



TITLE:

不安定状態から準安定状態への転移のダイナミックス(「分子結晶における相転移と分子運動」,基研研究会報告)

AUTHOR(S):

米谷, 快男児

---

CITATION:

米谷, 快男児. 不安定状態から準安定状態への転移のダイナミックス(「分子結晶における相転移と分子運動」,基研研究会報告). 物性研究 1971, 17(2): C11-C13

ISSUE DATE:

1971-11-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/88375>

RIGHT:

## 不安定状態から準安定状態への転移のダイナミックス

九大・薬 米谷 快男 児

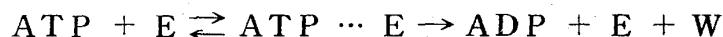
生命現象を非線形現象としてとらえようとする試みが、最近いろんな面で行なわれるようになった。生物系における、いろいろな規則あるパターン、或いはリズムといったものを、平衡から遠く離れたところで、物質や熱の流れの作る構造（散逸構造）として理解しようというのである。

Chemical instability での種々の構造の出現については、西山氏の紹介があった。

生物的な興味から離れてみても、散逸構造におけるエルゴート性の検討、或いは一つの散逸構造から他の散逸構造への遷移の問題等は非常に興味ある問題である。このような問題を考えるとき、Prigogine一派の取扱い、主として転移点近傍を問題とする安定理論ではなくミクロな、分子レベルからの考察が必要となる。

生体運動についての考察を、清水氏の考えにそって簡単に紹介する。現象論的な取扱いではあるが、ミクロな考察への一つの手がかりを与えることが期待できる。

生体運動は、一般に沢山の運動性酵素におけるメカノケミカル過程のエレメンタリー・サイクルの集合によって生体にひきおこされる。エレメンタリー・サイクルとは化学的な自由エネルギーを使っておきる運動性酵素の方向性のある運動である。ここでいう方向性のある運動とは、内部自由度の協力的で coherent な運動によっておきる、生体高分子のマクロな運動である。メカノケミカル系は次の式で表わすことができる。



ここで  $\text{ATP} \cdots \text{E}$  という状態にある high energy complex（以下 active complex と呼ぶ）は conformation change を通じて外界に対して W という仕事をする。いま active complex に N 個の fragments が存在し、その立体配

米谷快男児

置を  $\mathbf{r}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$  で与えることにする。各 fragment は次の方程式によって与えられる運動をすると仮定する。

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = - \sum_j \mathbf{F}_{ij}(\mathbf{r}_{ij}) + \mathbf{F}_i^0(\mathbf{r}_i) + \mathbf{f}_i \quad (1)$$

ここで右辺第一項は、active complex のまわりにある、例えば水分子などの低分子との相互作用による減衰項であり、 $\mathbf{F}$  は fragment 間の相互作用及び引力との和として

$$\mathbf{F}_i(\mathbf{r}) = \sum_{j(\neq i)} \mathbf{F}_{ij}(\mathbf{r}_{ij}) + \mathbf{F}_i^0(\mathbf{r}_i) \quad (2)$$

で表わされる。 $\mathbf{f}_i$  は random force である。

active complex が random に conformation change をするか、cooperative に変るかをみるためには、 $\langle \mathbf{v}_i(\mathbf{r}) \rangle$  を計算してみればよい。時刻  $t = 0$  で active complex は conformation change の直前にあったとして  $\mathbf{r}_i(0) = 0$ ,  $\mathbf{v}_i(0) = 0$  とおき、条件付確率  $P(0, 0, 0 | \mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  を計算してみよう。いま  $P$  が次のように書けると仮定する。

$$\begin{aligned} P(0, 0, 0 | \mathbf{r}, \mathbf{v}, t) &\equiv P(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \\ &= P_0(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + P_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \end{aligned} \quad (3)$$

$P_0$  は平衡な conformation をとりながら変化していく項で、 $P_1$  はそれからのずれである。異方性のある運動は  $P_1$  より出る。(3) 及び局所場近似を用いて (2) を書き直すと

$$\mathbf{F}_i(\mathbf{r}) = \mathbf{G}_i(\mathbf{r}_i) + \Delta \mathbf{F}_i(\mathbf{r}_i)$$

ここで

$$\begin{aligned} &\sum_{j(\neq i)} \int d\mathbf{v} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_{i-1} d\mathbf{r}_{i+1} \dots d\mathbf{r}_{j-1} d\mathbf{r}_{j+1} \dots d\mathbf{r}_N \mathbf{F}_{ij}(\mathbf{r}_{ij}) P_1 \\ &\simeq (N-1) \int d\mathbf{v} \int d\mathbf{r}' \mathbf{F}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}') P_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \\ &\equiv \nabla \mathbf{F}_i(\mathbf{r}_i), \end{aligned} \quad (4)$$

$$dr' \equiv dr_1 \cdots dr_{i-1} dr_{i+1} \cdots dr_N,$$

であり,  $G_i(r_i)$  は外力と  $P_0$  について平均したポテンシャルの和である。これを用いて Langevin 方程式を書き直すと

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -\gamma_i \mathbf{v}_i + \mathbf{G}_i + \Delta \mathbf{F}_i + \mathbf{f}_i$$

となる。定法に従って  $P$  に対する Fokker-Planck 方程式を導くと

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P = & -\frac{1}{m_i} \nabla_{\mathbf{r}_i} \cdot [\mathbf{p}_i P] + \nabla_{\mathbf{p}_i} \cdot \left[ \left\{ \frac{\gamma_i}{m_i} \mathbf{p}_i - \mathbf{G}_i \right. \right. \\ & \left. \left. - \Delta \mathbf{F}_i \right\} P \right] + D_i \nabla_{\mathbf{p}_i}^2 P, \end{aligned}$$

$$\mathbf{p}_i = m_i \mathbf{v}_i$$

となる。この式を  $P_1$  について一次の項までとり,  $i$  という suffix をとって書くと

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P_1 = & -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot (\mathbf{v} P_1) + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot [\{\gamma \mathbf{v} - \mathbf{G}\} P_1] \\ & + D \nabla_{\mathbf{v}}^2 P_1 - \nabla_{\mathbf{v}} \cdot [\Delta \mathbf{F} P_0], \end{aligned} \quad (5)$$

(4) 式は

$$\Delta \mathbf{F} = \int d\mathbf{v} \int d\mathbf{r}' P_1(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \mathbf{F}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (6)$$

(5), (6) 式はプラズマ instability の理論に於ける collisionless Boltzmann 方程式, 及び Poisson 方程式と対比して考えることができる。(5), (6) から  $\langle \mathbf{v} \rangle \rightarrow$  大なる instability の条件を求めればよいが, これには2つの方法があると思われる。Computer で numerical な計算をするか, 或いは解析的な解を適当な近似のもとで求めるか, であるが細部にわたっての議論は目下検討中である。